Exercises on the Monte Carlo method/Exercices sur la méthode Monte Carlo

(Dated: November 26, 2013)

Questions:

1. **EN:** Write a code that uses the Monte Carlo method to compute the value of $\pi = 3.14$. **FR:** Ecrire un code pour calculer la valeur de $\pi = 3.14$ en utilisant la methode Monte Carlo.

2. **EN:** By using the Metropolis algorithm compute the value of the integral **FR:** En utilisant l'algorithme de Metropolis calculer la valeur de l'intégrale

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |x| e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |x| e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |x| \bar{\rho}(x) dx, \tag{1}$$

   EN: where $\bar{\rho}(x) = e^{-x^2}/\sqrt{\pi}$ is a probability distribution **FR:** où $\bar{\rho}(x) = e^{-x^2}/\sqrt{\pi}$ est une distribution de probabilité. **EN:** You can discard the equilibration time of the Metropolis algorithm. **FR:** Vous pouvez ignorer le temps d'équilibration de l'algorithme de Metropolis.

3. **EN:** Compute the analytic value of I and compare it to the value obtained numerically **FR:** Calculer la valeur analytique de I et la comparer à la valeur numérique.

4. **EN:** By using the Metropolis algorithm compute the value of the integral **FR:** En utilisant l'algorithme de Metropolis calculer la valeur de l'intégrale

$$C = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx. \tag{2}$$

EN: You have the choice of working by yourself or with another student (at most 2 students can work together). You can discuss with your colleagues about the theory and the implementation. However, you have to individually (or within your group of two) write your code. I strongly discourage copying parts of someone else code or exchanging files. Since you will receive a grade for this work, identical or suspiciously similar codes will be graded with 0/20. The name of the Fortran files must be `question1_yourlastname.f90` for question 1, `question2_yourlastname.f90` for question 2, and `question4_yourlastname.f90` for question 4. If you work in a group of two the name of the files should be `question1_lastname1_lastname2.f90`, `question2_lastname1_lastname2.f90`, and `question4_lastname1_lastname2.f90`. Inside your `.f90` files you should write in a comment (the comments start with `!`) the complete names of the people working on it (last names, first names, middle names). At the end of the first session (November 26) I will collect the codes that you have written for question 1. You will have 4 additional hours on December 10 to finish the rest. You are required to use comments to explain each part of your Fortran code. It is also necessary to prepare a short written report to present the final results of your code and compare them with the theoretical value (question 3). **FR:** Vous pouvez choisir de travailler seuls ou en binome (pas plus de 2 etudiants peuvent travailler ensemble). Vous pouvez discuter de la theorie et de l'implementation avec vos collegues. Toutefois, chaque etudiant ou binome doit ecrire son propre code. Puisque vous recevrez une note pour ces exercices, les codes identiques ou "trop" similaires seront notés avec 0/20. Les noms des fichiers Fortran doivent etre `question1_votrenom.f90` pour la question 1, `question2_votrenom.f90` pour la question 2, et `question4_votrenom.f90` pour la question 4. Si vous travaillez en binome les noms des fichiers doivent etre `question1_nom1_nom2.f90`, `question2_nom1_nom2.f90` et `question4_nom1_nom2.f90`. A l'interieure des fichiers `.f90` vous devez ecrire des commentaires avec vos noms complets (nom, prenom). Je vous rappelle que les commentaires peuvent etre inserés apres `!`. A la fin de la seance du 26 Novembre, je recueillerai les codes que vous avez ecrit pour la question 1. Le 10 decembre vous aurez quatre heures additionnelles pour terminer les autres questions. Vous devez utiliser des commentaires dans les fichiers Fortran pour expliquer chaque partie de votre code. Il est aussi nécessaire de rédiger un bref compte-rendu écrit pour présenter les résultats finaux de votre code et les comparer avec la valeur théorique (question 3).

EN: Usually, the Monte Carlo method is used to evaluate complex multidimensional integrals. This exercice is not designed to give you an idea of the efficiency of the Monte Carlo method to treat "real" complex problems but to help you to understand the basic ideas of the Metropolis algorithm through an analytically solvable one-dimensional problem. **FR:** La méthode Monte Carlo est d'habitude utilisée pour evaluer des intégrales multidimensionnelles très compliqées. Le but de cet exercice n'est pas de vous donner une idée de l'efficacité de la méthode Monte Carlo pour traiter des problèmes complexes mais de vous aider à vous familiariser avec les idées de base de l'algorithme de Metropolis à travers un simple problème unidimensionel qui peut être résolu analytiquement.

EN: The solution of this exercise requires the generation of several random numbers `r`. These numbers can be generated by using `call random_number(r)` in your Fortran code. At each call this subroutine generates a different random number `r` in the interval $[0, 1[$. If `r` is defined as un array each component `r(1),r(2),...` will contain a different random number. **FR:** La generation de plusieurs nombres aléatoires `r` est nécessaire pour résoudre cet exercice. Ces nombres peuvent être généré en utilisant `call random_number(r)` dans votre code Fortran, où `r` est une variable réelle. Chaque fois que cette subroutine est appelée, un nombre aléatoire différent dans l'intevalle $[0, 1[$ est produit. Si `r` est un array chaque composante `r(1),r(2),...` correspondra à un nombre aléatoire different.

I. METROPOLIS ALGORITHM/ALGORITHME DE METROPOLIS

EN: The purpose of this algorithm is to generate a chain of random variables x_n (a Markov chain) that, after a certain equilibration period, is distributed according a given probability distribution $\bar{\rho}(x)$. **FR:** Le but de cet algorithme est de générer une chaîne de variables aléatoires (une chaîne de Markov) qui, après un certain nombre d'itérations nécessaire á atteinde l'équilibre, sont distribuées selon une certaine distribution de probabilité $\bar{\rho}(x)$.

1 **EN:** Choose an initial guess for x_1 / **FR:**Choisir une valeur initiale pour x_1
2 do $n = 1, \ldots$ **EN:** until convergence: / **FR:** jusqu'a la convergence est atteinte:
3 **EN:** A move is proposed by generating a new configuration x' according to a transition probability $T(x'|x_n)$
FR: Une nouvelle configuration x' est generee a travers la probabilite de transition $T(x'|x_n)$
4 **EN:** A random number r_n ($0 \leq r_n < 1$) is generated: **FR:** Un nombre aleatoire r_n ($0 \leq r_n < 1$) est genere'
if ($r_n \leq A(x'|x_n)$) then
$x_{n+1} = x'$
else
$x_{n+1} = x_n$
end if
where/ou'
$A(x'|x_n) = Min\left\{1, \frac{\bar{\rho}(x')T(x_n|x')}{\bar{\rho}(x_n)T(x'|x_n)}\right\}$
5 **EN:** Compute the current approximation of the integral $\frac{1}{n}\sum_{i=2}^{n+1} f(x_i)$
FR: Calculer l'approximation courante de l'integrale $\frac{1}{n}\sum_{i=2}^{n+1} f(x_i)$
6 end
7 **EN:** return the value of the integral **FR:** donner la valeur de l'integrale

EN: A few remarks and hints; **FR:** quelque remarque et suggestion:

Line/Ligne 1: **EN:** In principle the final result should not depend on this choice. For the purpose of your exercise I suggest the value $x_1 = 0$. **FR:** En principe le résultat final ne dépend pas de ce choix. Pour le but de votre exercice je vous suggère la valeur $x_1 = 0$.

Line/Ligne 2: **EN:** "until convergence" means until you are satisfied of the accuracy of the integral evaluated in Line 5. **FR:** "jusqu'à la convergence est atteinte" signifie jusqu'à vous êtes satisfaits de la précison atteinte par l'intégrale évalué dans la ligne 5.

Line/Ligne 3: **EN:** You can use a uniform transition probability T in the interval $[x_n - a; x_n + a]$. I suggest the value `a=2.D0` but you can also try to test different values. By using the uniform transition probability we have $T(x'|x_n) = T(x_n|x')$ and $A(x'|x_n) = Min\left\{1, \frac{\bar{\rho}(x')}{\bar{\rho}(x_n)}\right\}$ on line 5. **FR:** Vous pouvez utiliser une probabilité de transition T uniforme dans l'intevalle $[x_n - a; x_n + a]$. Je suggère la valeur `a=2.D0` mais vous pouvez essayer des valeurs différentes. En utilisant cette probabilité de transition uniforme nous avons $T(x'|x_n) = T(x_n|x')$ et $A(x'|x_n) = Min\left\{1, \frac{\bar{\rho}(x')}{\bar{\rho}(x_n)}\right\}$ en ligne 5.

Line/Ligne 5: **EN:** On this line the function $f(x)$ stands for a general function that could be $|x|$ (question 1) or x^2 (question 3). **FR:** La fonction $f(x)$ est n'importe quelle fonction. Pour ce qui concerne l'exercice cette fonction correspond à $|x|$ (question 1) ou x^2 (question 3).